

# НАПРАВЛЕННЫЙ ПОИСК, МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ И ОБМЕННЫХ ПРОЦЕССОВ ИЗОТОПНОГО РАЗДЕЛЕНИЯ

Балашков В.С., Вергун А.П., Беляков Д.М.

Научный руководитель Вергун А.П., д.ф.-м.н., профессор

Национальный исследовательский Томский политехнический университет: 634050, Россия,  
г. Томск, пр. Ленина 30 anatoli@tpu.ru

При выборе ионитов для процессов изотопного разделения используется метод направленного поиска систем с максимальными разделительными свойствами. Основные принципы такого поиска следующие. Важнейшая характеристика процесса изотопного разделения - однократный коэффициент разделения ( $\alpha$ ) может быть рассчитан в обменных процессах через значения  $\beta$  - факторов участвующих в обмене соединений ( $\beta_1$  и  $\beta_2$ ). Получены формулы для расчета  $\beta$  - факторов в системах, использующих ионообменные материалы. Кроме рассматриваемого метода поиска обменных систем с максимальными эффектами разделения по  $\beta$  - факторам предложена математическая модель расчета  $\alpha$  в системе ионит - раствор на основе представлений о электростатическом взаимодействии ионов.

На основании результатов направленного поиска систем с максимальными разделительными характеристиками предложены способы разделения изотопов. Таким образом, теоретическое определение  $\beta$  - факторов позволяет провести расчеты однократных коэффициентов разделения для широкого круга реакций изотопного обмена. Получены математические модели процессов изотопного разделения в виде дифференциальных уравнений в частных производных. При моделировании мембранных процессов система мембрана – раствор заменяется эквивалентным электролитом, в котором рассматривается разделительный процесс.[1].

Для моделирования, определения оптимальных условий разделения изотопов различных элементов при изотопном обмене и электрохроматографии использовались методы планирования экстремальных экспериментов [2,3]. При разделении изотопов электрохроматографическим методом с применением ионитов в качестве функции отклика использовалась относительная концентрация выделяемого изотопа в продукте ( $y_1$ ) и относительный выход целевого компонента ( $y_2$ ).

Факторами являются следующие величины: концентрация раствора в разделительной установке, скорости противотока в растворе и ионите, напряженность электрического поля.

Для первого параметра оптимизации получены значения коэффициентов уравнения регрессии:

$b_0=0,56$ ;  $b_1=0,01$ ;  $b_2=0,14$ ;  $b_3=0,05$ ;  $b_4=-0,04$ ;

Значение коэффициентов уравнения регрессии применительно ко второму параметру оптимизации следующее:  $b_0=0,36$ ;  $b_1=0,05$ ;  $b_2=-0,09$ ;  $b_3=-0,03$ ;  $b_4=0,08$ ;

При проверке полученных уравнений на адекватность по критерию Фишера установлено, что полученные математические модели адекватно описывают разделительный процесс.

В процессах разделения изотопов применялись такие критерии оптимизации как коэффициенты разделения, ВЭТТ, степень разделения, относительный выход обогащенного продукта, относительное содержание выделяемого изотопа в отборе и отвале. Для получения математических моделей процессов разделения изотопов использовались также обобщенные критерии. При разработке обобщенных критериев учитывается тот факт, что с увеличением обогащения продукта его себестоимость и ценность "возрастает не пропорционально относительной концентрации выделяемого изотопа, а по более сложной зависимости. Относительная концентрация в данном случае входит в обобщенный критерий в виде степенной или логарифмической функции.

Проведена проверка математических моделей на адекватность, предложены методы устранения неадекватности математических моделей в процессах разделения изотопов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дрогалев А.С., Вергун А.П., Балашков В.С., "Моделирование электроионитных процессов разделения изотопов и деионизации растворов, "Известия вузов. Физика, Т. 56, № 11/3, 2013. С. 297-303.
2. Балашков В.С., Иванушкин Ю.С., Вергун А.П., Дрогалев А.С., "Разделение изотопов в обменных и электрохроматографических колоннах с движущимся слоем ионита, "Известия вузов. Физика, Т. 56, № 4/2, 2013. С. 69-73.
3. Балашков В.С., Вергун А.П., Дрогалев А.С. Особенности гибких разделительных процессов, включающих изотопный обмен и электрохроматографии: сборник трудов XVIII международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых // Современные техника и технологии: сборник трудов XVIII международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Томск. 2012. Т. 3. С. 9-10.